

Компьютерное моделирование магнитоактивных эластомеров методом молекулярной динамики

Добросердова А. Б.¹, Смагин Д. А.², Шапочкин В. Э.², Санчез Ромеро П. А.², Канторович С. С.^{2,3}

¹Уральский математический центр, Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, РФ

²Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, РФ

³Университет г. Вена, г. Вена, Австрия

Электронная почта ответственного автора: Alla.Dobroserdova@urfu.ru

Магнитные эластомеры – это системы, состоящие из магнитных (дипольных) частиц, распределенных в немагнитной эластичной матрице. Размер магнитных частиц составляет от нескольких нанометров до нескольких микрометров. При математическом моделировании таких систем магнитный момент дипольных частиц может быть представлен в виде вектора, величина которого постоянна, а направление зависит от внутренней структуры частицы и направления внешнего магнитного поля. В рамках математической модели магнитные эластомеры будут представлены как магнитные частицы, расположенные в эластичной матрице, которая моделируется упругим взаимодействием (визуально это можно представить в виде гармонических пружинок, прикрепленных к магнитным частицам), а магнитные частицы – дипольными мягкими сферами. Основной метод исследования – компьютерное моделирование методом молекулярной динамики в программной среде ESPResSo [1]. В результате для каждой исследуемой системы строятся основные кривые намагничивания, которые имеют форму гистерезиса, и диаграммы распределения обратных кривых намагничивания первого порядка (FORCs – First Order Reversal Curves), используя классический метод, описанный К. Пайком [2].

Для модели магнитоактивных эластомеров с использованием двух гармонических пружинок для каждой магнитной частицы, предотвращающих ее перемещение и вращение, рассмотрены несколько полидисперсных систем с различным количеством фракций магнитных частиц (от двух до пяти). В результате проведения исследования оказалось, что учет большего числа фракций не влияет на форму гистерезиса намагниченности, а также на положение пика и форму FORCs-диаграмм. То есть для изучения вклада полидисперсности достаточно рассматривать бидисперсные приближения магнитоактивных эластомеров.

Для второй рассмотренной модели с четырьмя гармоническими пружинками рассмотрены бидисперсные приближения магнитоактивных эластомеров. С ростом объемной доли мелких частиц в системе ширина гистерезиса намагниченности уменьшается, пик FORCs-диаграммы сдвигается в сторону меньших значений коэрцитивных полей, становится более размытым вдоль оси коэрцитивной силы. Это связано с уменьшением коэрцитивности системы. При увеличении магнитного момента мелких частиц, наблюдается изменение формы гистерезиса, что связано с тем, что магнитные взаимодействия в системе становятся сильнее.

[1] <http://espressomd.org/>;

[2] C.R. Pike, A.P. Roberts, and K.L. Verosub J. Appl. Phys., 85 (1999) 6660-6667.